

5. MODELIZACION MATEMATICA DEL MOVIMIENTO DE LOS PLAGUICIDAS HACIA Y EN LAS AGUAS SUBTERRANEAS

5.1. Tipos de modelos

5.1.1. *Modelos existentes en función del método empleado*

5.1.2. *Modelos existentes según el uso al que se destinan*

5.2. Modelización de los procesos seguidos por los plaguicidas en la zona no saturada

5.2.1. *Transporte*

5.2.2. *Absorción*

5.2.3. *Degradación*

5.2.4. *Volatilización*

5.2.5. *Incorporación a las plantas*

5.3. Modelización de los procesos de los plaguicidas en la zona no saturada

5.3.1. *Flujo del agua en la zona saturada*

5.3.2. *Coeficiente de almacenamiento*

5.3.3. *Coeficiente de conductividad hidráulica*

5.3.4. *Coeficiente de transmisividad*

5.3.5. *Coeficiente de dispersión hidrodinámica*

5.4. Validez de la utilización de los modelos matemáticos en el estudio de la contaminación del agua subterránea por plaguicidas

5. MODELIZACION MATEMATICA DEL MOVIMIENTO DE LOS PLAGUICIDAS HACIA Y EN LAS AGUAS SUBTERRANEAS

El transporte de plaguicidas a través de las zonas no saturada y saturada está afectado por un gran número de procesos como la sorción, desorción, degradación química y biológica, volatilización, fotólisis, etc.

En este sentido la modelización matemática es una herramienta importante para proceder a una evaluación realista de las posibilidades de transporte de los plaguicidas hacia y por las aguas subterráneas, puesto que permite cuantificar los diversos procesos que intervienen y su interacción, como se analizará en los siguientes apartados.

5.1. TIPOS DE MODELOS

Existen diferentes tipos de modelos que permiten caracterizar el comportamiento de los plaguicidas en el suelo y el agua subterránea. Estos pueden clasificarse según la manera en que se construyen o el uso que pretende hacerse de los mismos.

5.1.1. Modelos existentes en función del método empleado

Pueden diferenciarse los siguientes tipos:

A.– Modelos deterministas

En ellos se supone que el sistema suelo-agua-plaguicida funciona de tal forma que la ocurrencia de una serie dada de eventos da lugar a una respuesta unívocamente definida.

Estos modelos sólo pueden simular la respuesta del sistema ante una determinada serie de condiciones simples, y el grado de exactitud en las predicciones hechas por el modelo depende de la naturaleza y extensión de la variabilidad asociada a los procesos físicos, químicos y biológicos que se puedan producir dentro del sistema. En la formulación determinista se ignora la incertidumbre pareja a la Naturaleza misma, al muestreo y a las medidas.

Prácticamente la totalidad de los modelos de plaguicidas existentes en la actualidad pertenecen a este grupo.

B.– Modelos estocásticos

Consideran la incertidumbre que va ligada a cualquier sistema natural y de medida. En la modelización estocástica se tratan en términos estadísticos tanto los procesos que tienen lugar dentro del sistema como la respuesta a los mismos. Las predicciones que proporcionan no se realizan para un punto concreto del suelo con coordenadas determinadas sino en términos de áreas o volúmenes.

Aunque actualmente los modelos estocásticos no están apenas desarrollados para el estudio de los plaguicidas, se muestran como la clara alternativa que sustituirá a los modelos deterministas en el futuro de la modelización.

5.1.2. Modelos existentes según el uso al que se destinan

Pueden distinguirse tres tipos: investigación, gestión y predicción. De todos ellos existen ejemplos de su aplicación en diferentes estudios de plaguicidas.

A.– Modelos de investigación

Son modelos complejos que consideran diversos factores. Están basados en diferentes métodos de cálculo numérico.

Requieren normalmente un número muy elevado de datos de partida, por lo que en la práctica sólo los suele utilizar el propio creador del modelo en un número limitado de áreas experimentales, con numerosos datos, o en base a experimentos de laboratorio.

Los modelos de investigación que se han desarrollado en la última década son básicamente de tipo estocástico y se han utilizado como herramientas de ayuda en las pruebas de hipótesis y en el estudio de áreas sobre las que existe un conocimiento incompleto relativo a los procesos de los plaguicidas.

B. – Modelos de gestión

En este tipo de modelos se asumen sustanciales simplificaciones de la naturaleza del sistema por lo que únicamente proporcionan una guía cualitativa sobre el comportamiento de los plaguicidas en función principalmente del suelo y de las características químicas de los plaguicidas.

Requieren muchos menos datos y pueden aplicarse a diferentes tipos de situaciones, es decir, son más flexibles que los anteriores.

C. – Modelos de predicción

Los modelos de predicción se desarrollan con un propósito muy concreto: la comparación cuantitativa del comportamiento de un plaguicida bajo un conjunto de condiciones muy limitadas y cuidadosamente definidas.

En ellos se realiza una descripción muy completa de los mecanismos básicos y proporcionan soluciones analíticas exactas para un caso concreto muy bien definido pero no suelen utilizarse en trabajos de campo.

Se emplean principalmente para realizar comparaciones entre diferentes plaguicidas.

5.2. MODELIZACION DE LOS PROCESOS SEGUIDOS POR LOS PLAGUICIDAS EN LA ZONA NO SATURADA

La zona no saturada, está situada entre el nivel freático y la superficie del terreno. Tiene alguna pequeña porción (parte baja de raíces) saturada de agua permanentemente, y otras en las que ocasionalmente puede producirse saturación pero que transcurrido cierto tiempo pierden el agua. En la zona no saturada se distinguen tres subzonas:

a) Subzona sometida a evapotranspiración: comprendida entre la superficie del terreno y los extremos radiculares de la vegetación. Cuando no hay vegetación puede tener un espesor muy pequeño (entre 8 y 25 cm) y si la hay puede alcanzar profundidades de hasta 3 ó 4 m.

b) Subzona intermedia: de características totalmente similares a la anterior, está situada debajo de ella. al no estar afectada por las raíces de las plantas es más compacta.

c) Subzona capilar: es la de transición a la zona saturada propiamente dicha y alcanza una altura sobre la superficie freática que depende de la fuerzas capilares. Su parte inferior está también saturada.

El límite superior de la subzona capilar con la subzona intermedia puede estar muy definido o ser apenas perceptible, según el tipo de materiales del suelo.

Los modelos existentes en la actualidad para predecir el comportamiento de los plaguicidas en la zona no saturada del suelo consideran los procesos físicos, químicos y biológicos que afectan a su transporte y diversos procesos de degradación e inactivación de los mismos.

Estos modelos emplean siempre la columna del suelo unidimensional de propiedades homogéneas debido a que la cuantificación de los diversos procesos envueltos se ha realizado en base a estudios experimentales de laboratorio.

A continuación se exponen los modelos para los distintos procesos que tienen lugar en la zona no saturada y se definen los distintos parámetros y variables que se tienen en consideración.

5.2.1. Transporte

El transporte de plaguicidas está afectado por procesos de tipo físico (convección o flujo de masa) y químico (difusión). Este puede ser cuantificado mediante una ecuación hiperbólica en derivadas parciales denominada de convección-dispersión.

Así, para un soluto que no interactúa con el medio, en condiciones de estado estacionario para el flujo del agua y en suelo homogéneo, la ecuación del transporte se puede escribir como (Wagener, R.J.; 1.986):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - V \frac{\partial c}{\partial z} \quad (1)$$

donde:

* C es la concentración de plaguicida [M/L³], en el agua.

* D es el coeficiente de difusión [L²/T], que incorpora tanto la difusión química como la dispersión hidrodinámica.

* V es la velocidad del agua en los poros [L/T], que se define como el cociente entre el flujo de agua y el contenido de agua (en volumen).

* z y t son la profundidad [L] y el tiempo [T], respectivamente.

Si se consideran también la interacción del compuesto con el suelo y los procesos de degradación y volatilización la ecuación 1 se transforma en la siguiente:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial s}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - V \frac{\partial c}{\partial z} - G \quad (2)$$

donde:

* S es la concentración adsorbida de pesticida definida como Ms/M, donde Ms denota la masa de soluto y M la masa de suelo, y

* G denota el término de degradación (química o biológica).

Si hay plantas presentes que pueden incorporar el plaguicida a su biomasa, se puede introducir un segundo término análogo a G. Los procesos de volatilización se pueden introducir de varias formas. La incorporación a las plantas, la volatilización y las relaciones funcionales utilizadas para S y G se muestran en los apartados siguientes.

La ecuación (2) es la más utilizada en los estudios de laboratorio que pretenden establecer el modelo de comportamiento de los plaguicidas para un amplio rango de condiciones de contorno. Es una aproximación útil en investigaciones en las que se puedan realizar controles cuidadosos del flujo de agua y de soluto y ha sido aplicada con éxito por diversos autores (Zhong et al., 1.986, Jones, R.L., 1.986, ...) para caracterizar el transporte de diferentes plaguicidas a través de columnas de suelo.

No obstante las limitaciones que se admitieron en su formulación, como la condición de estado estacionario para el flujo de agua y de solutos, hace inviable su utilización en estudios de campo.

Para que la ecuación (2) refleje condiciones de flujo variable, se requiere que se añadan términos sobre la dependencia del agua y del soluto con la profundidad y el tiempo. Así reformulada, la ecuación (2) queda:

$$\frac{\partial(vc)}{\partial t} + \frac{\partial(ds)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} [VD(vq) \frac{\partial c}{\partial z} - qc] - G(Z,t) \quad (3)$$

donde:

* $V = V(z, t)$, es el contenido volumétrico de agua en el suelo [L^3/L^3].

* d es la densidad del suelo [M/L^3].

* q es el flujo de agua [L/T].

* D depende ahora de v y q .

La degradación del plaguicida también depende de z y t ya que varía de acuerdo con los factores ambientales que son, a su vez, función de la profundidad (espesor del suelo) y del tiempo.

Para resolver la ecuación (3) es preciso conocer los cambios en el contenido y flujo del agua con la profundidad y el tiempo los cuales pueden obtenerse mediante la ecuación 4.

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(v) \frac{\partial H}{\partial z} \right] - U(z,t) \quad (4)$$

donde:

* $K(V)$ es la conductividad hidráulica del suelo [L/T] que depende del contenido en agua.

* $U(z, t)$ es el agua que incorporan las plantas [T^{-1}].

* H es la altura hidráulica [L].

Debe resaltarse que la precisión de los resultados obtenidos al aplicar las ecuaciones (3) y (4) dependerá de la exactitud con que se conozcan los valores K , U y H , por lo que cualquier incertidumbre asociada a ellos impondrá una incertidumbre en el valor obtenido de la concentración del plaguicida en el espacio y el tiempo.

5.2.2. Adsorción

La interacción de los plaguicidas con las arcillas y/o la materia orgánica del suelo, retarda el movimiento del plaguicida a través de la zona no saturada.

Para describir la adsorción se utilizan las ecuaciones de Freundlich:

$$S = K_D \cdot C \quad (5)$$

$$S = K_F \cdot C^N \quad (6)$$

donde:

* S y C son las definidas en las ecuaciones (1) y (2).

* K_D y K_F representan unos coeficientes de distribución apropiados (Wagenet, R.J., 1.986).

* N es una constante igual o menor que 1.

Los valores de N , que es una constante empírica, de K_D y K_F dependen del suelo y de las propiedades químicas del compuesto y se obtienen normalmente a partir de estudios de equilibrio en laboratorio a partir de procesos-tipo, si bien recientemente han sido obtenidos por experimentos de flujo a través de columnas de suelo.

A menudo los valores de K_D , K_F y N son desconocidos, lo cual ha llevado a la necesidad de utilizar métodos estimativos para calcularlos a partir de información más fácilmente disponible.

Algunos estudios (Cheng, H.H.; Koskinen, W.C., 1.986), han mostrado que la adsorción de los plaguicidas por el suelo está correlacionada con el contenido de éste en materia orgánica más que con el contenido en arcillas. De esta forma, las

constantes de adsorción se suelen expresar en función del contenido en materia orgánica del suelo K_{CO} . Esto se define como:

$$K_{CO} = K_D/f \quad (7a)$$

o bien

$$K_{CO} = K_F/f \quad (7b)$$

donde f , que varía entre 0 y 1, es la fracción decimal de carbono orgánico en el suelo sobre un peso determinado del mismo. Esta normalización produce valores de K_{CO} que son independientes del tipo de suelo.

A su vez, una manera de estimar el valor de K_{CO} es a través del coeficiente de partición octanol/agua K_{OA} . Así Karickhoff et al. (1.979) han propuesto determinar K_{CO} en el caso de compuestos hidrófobos según la relación siguiente:

$$\log K_{CO} = \log K_{OA} - 0,21$$

Por otra parte los valores de K_{CO} se pueden estimar si se conocen el punto de fusión y la solubilidad acuosa del plaguicida (Wagenet, R.J., 1.986).

$$\log K_{CO} = -0,921 \log X_{SOL} - 0,00953 (PF - 25) - 0,405 \quad (8a)$$

y

$$X_{SOL} = [(S/PM) \times 10^{-3}] / 55,56 \quad (8b)$$

donde:

* S es la solubilidad acuosa del plaguicida (g/ml).

* PM es el peso molecular del plaguicida (g/molec).

* PF es el punto de fusión del plaguicida ($^{\circ}C$), que se considera igual a $25^{\circ}C$ para plaguicidas que son líquidos a temperaturas menores o iguales a $25^{\circ}C$.

En la tabla 5.1. se muestra la comparación de los valores de $\log K_{CO}$ para diferentes PCBs. Los datos se refieren al intervalo de temperaturas entre 20° - $25^{\circ}C$, y (E) indica que son datos experimentales.

Las ecuaciones (7a) y (7b) permiten estimar los coeficientes K_D y K_F si se conoce el contenido del suelo en carbono orgánico (f).

Cuando el f es muy bajo o muy alto y/o existe gran cantidad de arcillas hinchables, el uso de las fórmulas (7a) y (7b) puede llevar a errores mayores (Hassett et al., 1.980, Karickhoff, 1.984).

Casi todos los modelos de plaguicidas utilizan las constantes K_{CO} , K_D o K_F para representar la interacción plaguicida-suelo. Debe señalarse que aunque existen expresiones más complicadas de los fenómenos de adsorción que las descritas no es necesario un nivel de resolución muy alto dada la incertidumbre existente en la obtención de los valores de otras variables como flujo del agua, degradación e incorporación del plaguicida a las plantas, así como la sensibilidad del sistema suelo-agua a los clásicos fenómenos de adsorción.

Por otra parte, los últimos estudios de campo sobre el movimiento de los plaguicidas parecen indicar la necesidad de reformular en futuras aproximaciones de los modelos los procesos de adsorción, considerando que parte del compuesto es adsorbido estacionariamente en la fase suelo/materia orgánica y que otra porción lo es en una fracción de materia orgánica soluble y móvil, con lo que es capaz de ser transportado a través de los poros.

5.2.3. Degradación

Mediante estudios experimentales (Vrba, J.; Romijn, E., 1.986), (Wagenet, R.J., 1.986), se ha establecido que tanto la degradación química como la microbiana pueden describirse mediante cinéticas de primer orden. Como ocurría en el

caso de la ecuación lineal para la sorción, la cinética de primer orden es una representación sencilla de un proceso mucho más complicado que permite obtener soluciones matemáticas a través de unos requerimientos razonables para los datos. La variabilidad espacial y temporal de los procesos de degradación está afectada por el contenido en agua, la temperatura, el tipo de sustrato, el pH y la variabilidad del transporte de plaguicida a través del perfil del suelo.

TABLA 5.1.

Compuesto	Referencias	f	Log K _{CO}
4-PCB	Steen et al (1978)	0,004-0,024	4,69-5,02 (E)
	Steen et al (1978)	0,004-0,024	4,72-5,11 (E)
	Chiou et al (1979)	0,018	4,91 (E)
	Karickhoff (1985)	0,0036	6,15 (E)
	Karickhoff (1985)	0,0036	>5,5
5-PCB	Gschwend y Wu (1985)	0,007	5,8 (E)
	Gschwend y Wu (1985)	0,025	5,9 (E)
	Karickhoff (1985)	0,0036	6,41 (E)
	Karickhoff (1985)	0,0036	6,3-6,4
6-PCB	Karickhoff (1985)	0,030	6,08 (E)
	Chiou et al (1979)	0,018	5,58 (E)
	Horzempa y Di Toro (1983)	0,045	5,34-5,58 (E)
	Voice et al (1983)	0,029-0,038	4,28-6,22 (E)
	Karickhoff (1985)	0,0036	6,86 (E)
	Karickhoff (1985)	0,0036	6,8-6,9

4-PCB es el 2,2',5,5'-tetraclorobifenilo.

5-PCB es el 2,2',4,5,5'-pentaclorobifenilo.

6-PCB es el 2,2',4,4',5,5'-hexaclorobifenilo.

La cinética de primer orden para los procesos de degradación se define como:

$$G = dC/dt = -KC \quad (9)$$

donde C es la concentración de plaguicida y K es la constante de reacción de primer orden [T⁻¹].

Cuando se integra la ecuación (9) desde C (0) = C₀ hasta C (t) y se reagrupa en términos de t, se puede obtener la vida media t_{1/2} como el tiempo requerido para que la concentración de plaguicida C, se reduzca a la mitad, C_{0/2}. Los valores de K y de t_{1/2} medidos tanto en experimentos de campo como de laboratorio, muestran coeficientes de variación que son en general inferiores al 100%. Por otra parte, se ha encontrado que los valores de K obtenidos en el laboratorio suelen ser inferiores a los obtenidos en campo, lo que parece ser una consecuencia de los múltiples caminos de degradación que operan en condiciones de campo y que no se reflejan adecuadamente en las condiciones de laboratorio. Así, los valores obtenidos de experimentos en laboratorio, aplicados al modelo anterior, tienden a sobreestimar la persistencia de los plaguicidas en condiciones de campo.

Debe destacarse que se emplea la cinética de primer orden para modelizar los procesos de degradación de los plaguicidas porque con ella se consigue un grado de exactitud suficiente dentro del contexto de los modelos existentes y porque aún

no se conocen suficientemente los mecanismos que operan en los procesos de degradación en condiciones de campo como para utilizar una cinética más complicada.

Otra expresiones para la cinética de degradación de los plaguicidas son:

a) Cinética de orden cero:

$$G = dC/dt = -K_0 \quad (10)$$

donde K_0 es la constante de reacción de orden cero, y

b) Reacción de Michaelis-Menten:

$$G = -(dC/dt) = K_m C / (K_s + C) \quad (11)$$

donde K_m es la constante de Michaelis [T^{-1}] y K_s es la constante de máxima velocidad de reacción. Ambas constantes dependen fundamentalmente, entre otros factores, del contenido en humedad del suelo y de la temperatura del mismo.

5.2.4. Volatilización

La cantidad de plaguicida que es susceptible de volatilizarse, es la resultante de sustraer al volumen inicial la porción que puede ser disuelta por el agua del suelo y la que se puede encontrar adsorbida. Por lo tanto la mayoría de los modelos de plaguicidas que consideran la volatilización requieren como datos de partida la solubilidad del plaguicida en el agua y la densidad del vapor saturado. Así:

$$C_g = K_H \cdot C \quad (12)$$

donde:

* C_g es la concentración del plaguicida en fase gaseosa [M/L^3].

• K_H es la constante de Henry.

C es la concentración del plaguicida en solución [M/L^3].

El valor de K_H se calcula a partir de:

$$K_H = d_g/s \quad (13)$$

donde:

* d_g es la densidad del vapor saturado.

* S es la solubilidad acuosa del plaguicida (g/ml).

Normalmente, estos valores suelen venir dados en los datos aportados por los fabricantes, y se supone que no dependen de la temperatura ni de la composición del suelo.

Una vez que se han estimado los valores de $C_g(z, t)$, es decir, la concentración de plaguicida en fase gaseosa en función de la profundidad y del tiempo, el flujo de plaguicida debido a la volatilización se calcula a partir de la ecuación de difusión, que tiene en cuenta, por una parte, el gradiente de C_g y por otra, que los poros del suelo están parcialmente llenos de agua.

El flujo de plaguicida debido a la volatilización se calcula utilizando las ecuaciones (12) y (13) y considerando únicamente

una capa superficial muy somera del perfil del suelo. Los procesos de volatilización no se incluyen en la mayoría de los modelos de gestión de plaguicidas y sólo lo son en unos pocos modelos de investigación.

5.2.5. Incorporación a las plantas

La absorción o incorporación del plaguicida a las plantas, es un proceso muy poco conocido debido a la casi total ausencia de información experimental cuantitativa del mismo. Además se presupone que la cantidad total de plaguicida que es absorbida por la planta es pequeña, en comparación con la que permanece en el suelo, por lo que no suele ser incluido en la modelización del comportamiento y destino de los plaguicidas en el suelo.

Se considera que el error que se produce al no tener en cuenta este proceso está dentro del "ruido" normal del modelo debido a las imprecisiones que se cometen en la estimación de los procesos físicos, químicos y biológicos que operan dentro del sistema.

La realidad es que se necesitan investigaciones más completas sobre la incorporación de plaguicidas a las plantas que permitan evaluar la validez de las suposiciones admitidas respecto a este proceso. A esta respecto cabe señalar que la absorción de agua por las plantas (correspondiente al término $U(z, t)$ en la ecuación 4), influye mucho en el flujo total del agua y éste afecta al desplazamiento del plaguicida, lo que parece reflejar la necesidad de considerar este factor.

5.3. MODELIZACION DE LOS PROCESOS DE LOS PLAGUICIDAS EN LA ZONA SATURADA

El transporte de plaguicidas a través de la zona saturada se realiza por los mecanismos habituales de convección y dispersión hidrodinámica. En algunos casos se pueden producir reacciones del soluto con el agua o con las rocas del acuífero.

Se exponen aquí los modelos de los procesos sufridos por los plaguicidas que tienen lugar en la zona saturada, definiéndose los distintos parámetros necesarios.

5.3.1. Flujo del agua en la zona saturada

Cuando se calcula el flujo de agua en la zona saturada, se supone que el medio acuífero cumple las características de ser continuo, incomprensible, no homogéneo y anisótropo.

Bajo estas condiciones la velocidad de flujo puede determinarse según la expresión dada por la ley de Darcy:

$$V_i = K_{ij} (\partial h / \partial x_j) \quad (14)$$

donde:

- * V_i es la velocidad del agua para la componente i [L/T].
- * K_{ij} es el tensor de los coeficientes de la conductividad hidráulica.
- * x_j son las coordenadas.

El tensor de los coeficientes de la conductividad hidráulica K_{ij} , se expresa:

$$K_{ij} = \begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{pmatrix} \quad (15)$$

Si el sistema de coordenadas coloca en la dirección principal del medio anisótropo, los componentes cruzados del tensor son cero y la ecuación (14) se puede escribir como:

$$V_x = -K_{xx} (h / x)$$

$$\begin{aligned} V_y &= -K_{yy} \left(\frac{h}{y} \right) \\ V_z &= -K_{zz} \left(\frac{h}{z} \right) \end{aligned} \quad (17)$$

Los modelos que describen relaciones no lineales entre la velocidad y el gradiente hidráulicos son raros y en hidrogeología casi nunca se usan.

5.3.2. Coeficiente de almacenamiento

El coeficiente de almacenamiento es la cantidad de agua que cede un prisma de acuífero de base cuadrado unitario cuando se le deprime la unidad. Consecuentemente no tiene dimensiones.

En los acuíferos libres el coeficiente de almacenamiento coincide con la porosidad eficaz, mientras que en acuíferos confinados este coeficiente depende de la deformación del medio poroso. Así, según el tipo de acuífero, se tiene:

Coeficiente de almacenamiento para un acuífero libre. El coeficiente de almacenamiento para un acuífero libre se puede expresar mediante la ecuación:

$$S_y = n - S_r \quad (18)$$

donde:

* S_y es el coeficiente de almacenamiento.

* n es la porosidad total.

* S_r es el coeficiente de retención específica, que indica la cantidad de agua retenida en los poros de la roca por fuerzas capilares.

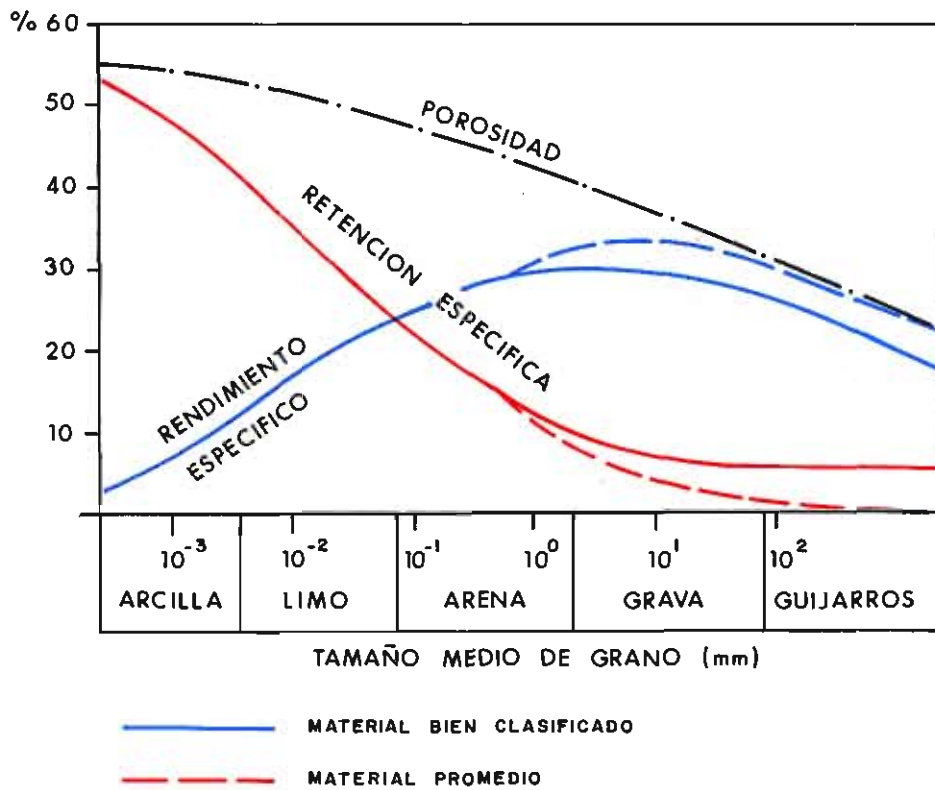


Figura 5.1.- Relación entre el rendimiento específico, la retención específica y el tamaño de grano (porosidad) (Fuente: Vrba, J., Romijn, E., 1.986).

En la figura 5.1 se muestra esquemáticamente la relación entre S_y , n y S_r .

Coeficiente de almacenamiento para un acuífero confinado. En el caso de un acuífero confinado el coeficiente de almacenamiento puede definirse como:

$$S = S_0 B \quad (19)$$

donde:

* S es el coeficiente de almacenamiento para un acuífero confinado.

* S_0 es el coeficiente de almacenamiento específico [L^{-1}].

* B es el espesor del acuífero [L].

Los valores de los coeficientes de almacenamiento para acuíferos confinados son claramente inferiores que los de los acuíferos libres y su magnitud es del orden de 10^{-4} a 10^{-7} .

5.3.3. Coeficiente de conductividad hidráulica (Permeabilidad)

Es el flujo de agua que atraviesa una sección unitaria de acuífero, bajo la influencia de un gradiente unitario a temperatura de campo.

Viene definida por la expresión

$$k = \frac{c \, d^2 \, \gamma}{\mu}$$

donde:

K = Conductividad hidráulica.

C = Constante adimensional.

d^2 = Factor que depende de la superficie intergranular.

γ = Peso específico del líquido.

μ = Viscosidad del líquido a temperatura T . Sus dimensiones son L/T .

Para el agua a 20°C $K = c \cdot d^2$. Aunque los cambios en la T modifican este valor en general no es preciso considerar estas variaciones en la práctica ya que las correcciones son de menor cuantía que los errores experimentales su obtención puede realizarse mediante medidas de laboratorio en muestras de suelos o mediante la realización en campo de pruebas hidrodinámicas (ensayos de bombeo, inyección, etc.).

En la tabla 5.2. se muestran los valores más representativos para diferentes materiales.

5.3.4. Coeficientes de transmisividad

La transmisividad de un acuífero es el volumen de agua que atraviesa una banda del acuífero de ancho unitario en la unidad de tiempo y bajo la carga de un metro. Esta variable es representativa de la capacidad que tiene el acuífero para ceder agua. Sus dimensiones son [L^2/T]. El coeficiente de transmisividad es el producto del coeficiente de conductividad hidráulica por el espesor saturado del acuífero.

En el caso de un acuífero confinado, se tienen las siguientes expresiones para los coeficientes de transmisividad:

TABLA 5.2.– VALORES TÍPICOS DE LA CONDUCTIVIDAD HIDRAULICA (PERMEABILIDAD)

$-\log_{10} K \text{ (cm.s}^{-1}\text{)}$	-1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Permeabilidad	Permeable			Semipermeable				Impermeable					
Acuífero	Buena				Baja				Ninguna				
Suelos	Grava Limpia		Arena limpia o arena y grava		Arena muy fina limo, loess marga								
					Turba		Arcilla estratificada		Arcilla no meteorizada				
Roca								Piedra arenisca	Piedra caliza y dolomía		Brecha, granito		

Fuente: Vrba, J.; Romijn, E., 1.986).

$$\begin{aligned}
 T_{xx}(x, y, t) &= K_{xx}(x, y) B(x, y) \\
 T_{yy}(x, y, t) &= K_{yy}(x, y) B(x, y)
 \end{aligned}
 \tag{20}$$

donde T_{ij} son los coeficientes de transmisividad en la dirección x e y ; K_{ij} son los coeficientes de conductividad hidráulica y B es el espesor del acuífero.

En el caso de acuíferos libres los coeficientes de transmisividad son función del nivel variable de la superficie del agua:

$$\begin{aligned}
 T_{xx}(x, y, t) &= K_{xx}(x, y) b(x, y) \\
 T_{yy}(x, y, t) &= K_{yy}(x, y) b(x, y)
 \end{aligned}
 \tag{21}$$

donde b es el espesor del acuífero libre, y se puede expresar como:

$$b(x, y, t) = (h(x, y, t) - z(x, y, t))
 \tag{22}$$

donde $h(x, y, t)$ es el nivel piezométrico en m.

Los coeficientes de transmisividad se obtienen por métodos similares a los de conductividad hidráulica, en general mediante pruebas hidrodinámicas de campo, que son las más adecuadas a este propósito.

5.3.5. Coeficiente de dispersión hidrodinámica

El coeficiente de dispersión hidrodinámica es un parámetro empleado como medida de la dispersión de una sustancia que fluye debido a la suma de los efectos de la dispersión mecánica y de la difusión molecular en un medio poroso.

Se consideran dos coeficientes de dispersión en función de su orientación respecto a la dirección principal del flujo del agua subterránea:

– Coeficiente de dispersión longitudinal (D_L), [L^2/T]

$$D_L = A_L \cdot V_e + D^* \quad (23)$$

– Coeficiente de dispersión transversal (D_T), [L^2/T]

$$D_T = A_T \cdot V_e + D^* \quad (24)$$

donde: A_L = Dispersividad longitudinal [L]

A_T = Dispersividad transversal [L]

V_e = Velocidad eficaz [L/T]

$$V_e = \frac{k \cdot i}{m_e}$$

D^* = Coeficiente de difusión molecular [L^2/T].

La importancia relativa de los dos sumandos de las ecuaciones (23) y (24) depende de la velocidad.

Así para velocidades altas $D^* \ll 0$, por lo tanto $D \approx A \cdot V_e$, mientras que adquiere gran importancia si la velocidad es baja en cuyo caso $D \approx D^*$.

El mejor método para determinar el coeficiente de dispersión hidrodinámica es la utilización de trazadores en experimentos de campo, puesto que los experimentos de laboratorio en muestras de roca no han proporcionado ninguna expresión sobre la dependencia real de dicho coeficiente con los factores que le influyen.

Hay trazadores de muy diversos tipos (disolución de cloruro sódico, especies coloreadas, esporas, radioisótopos, etc.).

La información que proporcionan se procesa suponiendo que el trazador se ha movido en un medio homogéneo e isotrópico.

Algunos autores clasifican los métodos de campo para la determinación de los coeficientes de dispersión con arreglo a la escala utilizada. Así:

a) Escala local o micro: entre 2 y 4 metros.

b) Escala zonal o macro I: entre 2 y 20 metros.

c) Escala zonal o macro II: ente 20 y 200 metros.

d) Escala regional: más de 100 metros.

En cuanto a los métodos individuales utilizados para determinar este coeficiente, se clasifican según las técnicas experimentales de campo utilizadas para realizar las medidas:

a) Escala local o micro (método del pozo único). El trazador se introduce en el acuífero a través de su inyección directa en el agua del pozo. Una vez introducido el trazador, se deja que evolucione y a continuación se va bombeando agua del pozo, de tal forma que el trazador retorna al mismo. En cada ensayo de bombeo se mide la cantidad de trazador que se recupera.

b) Escala zonal o macro I (método de los pozos múltiples). El trazador se dosifica, bien continua o discontinuamente, a través de un pozo de inyección y se mide su presencia en ensayos de bombeo realizados en otros pozos situados en la dirección del flujo.

c) Escala zonal o macro II (método del pozo único). El trazador se dosifica en el pozo de inyección y posteriormente se procede a detectar como se ha extendido mediante la utilización de técnicas geofísicas desde la superficie del terreno.

d) Escala regional (utilización de trazadores medioambientales, como fuentes de contaminación, isótopos naturales, etc.). La verificación de los parámetros de dispersión calculados de esta manera requiere normalmente la utilización de técnicas de modelización sofisticadas, entre ellas, la teoría de la variable regionalizada o geoestadística.

Los valores de la dispersividad longitudinal publicados por diferentes autores oscilan entre 0,1 y 15,0 metros.

5.4. VALIDEZ DE LA UTILIZACION DE LOS MODELOS MATEMATICOS EN EL ESTUDIO DE LA CONTAMINACION DEL AGUA SUBTERRANEA POR PLAGUICIDAS

Las ecuaciones empleadas para descubrir al transporte de plaguicidas y los diversos procesos que le afectan, que han sido analizados con detalle en los apartados precedentes, se han obtenido a partir de experimentos realizados básicamente en condiciones de laboratorio. Cuando se intentan extrapolar los resultados obtenidos en estas modelizaciones a estudios realizados en campo surgen dudas respecto a la validez de las simplificaciones admitidas en ellos.

La realidad es que, aunque hoy en día se conoce muy bien el funcionamiento de las columnas de suelo utilizadas en estudios de laboratorio, se sabe muy poco respecto a la magnitud, intensidad, variación e interacción de los procesos en condiciones reales de campo.

El primer experimento a gran escala realizado en campo para medir la relación K-V-H, utilizada en la ecuación (4) y los valores de D y V (ecuación (2)), demostró claramente que todas estas variables mostraban una importante variabilidad espacial. Otros estudios realizados posteriormente han confirmado, para una amplia variedad de tipos de suelos, que cada punto real en el campo está caracterizado por valores concretos de K, D y V, y que cada uno de ellos puede variar en varios órdenes de magnitud según sea el contenido en agua. De tales realidades físicas, seguramente debidas a la variación a nivel de microescala en la geometría del medio poroso se deduce que la formulación presentada en dichas ecuaciones es extremadamente simplista.

El modelo de plaguicidas expresado en las ecuaciones (2) a (4) ha sido también puesto en duda por estudios de campo que han mostrado que muchos suelos reales no cumplen las suposiciones que se han utilizado para desarrollar dichas ecuaciones. Así, en muchos casos no es cierto que prevalezca una distribución sencilla de tamaño de poro, sino que frecuentemente contienen caminos preferentes (grietas, etc.) a través de los cuales se mueven el agua y los solutos.

Estos suelos se caracterizan por no mostrar un flujo de agua uniforme a lo largo de su espacio poroso total, sino que transmiten grandes cantidades de agua durante los períodos húmedos a través de esos conductos preferentes.

Esta forma particular de transporte de agua y solutos, a menudo denominada de "cortocircuito", puede producir un movimiento importante de plaguicidas en o hacia zonas profundas del suelo en períodos de tiempo relativamente cortos. Estos hechos no están en absoluto descritos por las ecuaciones (2) a (4).

En la actualidad incluso se está poniendo en duda la propia utilidad de los modelos deterministas en el estudio del comportamiento de los plaguicidas. Algunos estudios realizados han puesto de manifiesto la variabilidad espacial de los coeficientes de sorción, al encontrar que plaguicidas que son fuertemente sorbidos se pueden encontrar al mismo tiempo tanto en la superficie del suelo como en capas profundas del mismo. Esto indica que algunos plaguicidas pueden adsorberse a algún tipo de fracción orgánica soluble y móvil, siendo transportados de la misma manera que si se tratara

de un soluto no interactuante con las partículas del medio. En estos casos, el balance entre la cantidad de plaguicida adsorbido, y la que no lo es, dado por las ecuaciones (5) y (6), no se corresponde con los procesos anteriormente descritos que tienen lugar en condiciones reales de campo.

Es decir, el análisis riguroso de los modelos de plaguicidas existentes en la actualidad refleja que no son capaces de estimar de una manera consistente y precisa la distribución espacial y temporal de la concentración de plaguicida en la zona no saturada. Esto es cierto aunque haya un buen nivel de resolución asociado a los principios básicos utilizados en dichas modelos, lo que parece indicar la necesidad de emplearlos exclusivamente para comparar el comportamiento relativo, no absoluto, de los plaguicidas en el suelo.

Por todo lo anterior, parece que se debe considerar una aproximación estocástica, más que determinista, para modelizar el movimiento del agua y de los plaguicidas en la zona no saturada.

Esto representa un cambio conceptual importante ya que los modelos estocásticos asumen que aunque el movimiento de los plaguicidas sigue ciertas leyes la componente aleatoria asociada a las mismas en sistemas heterogéneos adquiere mayor importancia. Por ello estos modelos describen el sistema suelo-agua-plaguicida en términos estadísticos con lo que las predicciones que proporcionan serán probabilísticas e incluirán los límites de confianza de estas.

Cabe señalar que para poder calcular la distribución de probabilidad para un proceso específico es necesario realizar el análisis de numerosos suelos por lo que parece prioritario incrementar el número de experiencias de este tipo que se realizan en la actualidad.

Dada la naturaleza variable y heterogénea del sistema suelo, la aproximación estocástica ofrecerá una buena oportunidad para predecir el destino y comportamiento de los plaguicidas de una manera conmensurable con la capacidad actual para cuantificar los procesos que tienen lugar en el suelo. No obstante, hasta que estos modelos se desarrollen adecuadamente, se deben tomar precauciones a la hora de utilizar e interpretar los resultados obtenidos a partir de los modelos deterministas disponibles en la actualidad.